

качестве транспортирующего агента увеличивает химический КПД процесса на 0,3% по сравнению с подачей угля воздухом, а по сравнению с подачей азотом на 1,8%. Результаты моделирования схемы с мокрой топливоподачей в реактор типа *GE* показали, что использование в качестве транспортирующего агента жидкого диоксида углерода не дает увеличения химического КПД по сравнению с подачей угля в виде ВУС. Однако в схемах с системой улавливания и утилизацией диоксида углерода (*CCUS*) применение такого технологического решения видится целесообразным.

## СТАТИСТИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ ОБРАБОТКИ МАССИВОВ ДАННЫХ В РАМАНОВСКОЙ ТЕРМОСПЕКТРОСКОПИИ МИНЕРАЛОВ

Панкрушина Е.А.<sup>1\*</sup>, Кобузов А.С.<sup>1</sup>, Щапова Ю.В.<sup>1,2</sup>, Вотяков С.Л.<sup>1</sup>

<sup>1)</sup> Институт геологии и геохимии им. А.Н. Заварицкого УрО РАН,  
г. Екатеринбург, Россия

<sup>2)</sup> Уральский федеральный университет имени первого Президента России  
Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия

\*E-mail: [pankrushina@igg.uran.ru](mailto:pankrushina@igg.uran.ru)

## STATISTICAL DATA PROCESSING OF RAMAN THERMAL SPECTROSCOPY IN MINERALS

Pankrushina E.A.<sup>1\*</sup>, Kobuzov A.S.<sup>1</sup>, Shchapova Yu.V.<sup>1,2</sup>, Votyakov S.L.<sup>1</sup>

<sup>1)</sup> Zavaritsky institute of Geology and Geochemistry, Yekaterinburg, Russia

<sup>2)</sup> Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

Raman thermal spectroscopy is a powerful tool for the investigation of phase transitions in minerals. However, for some mineral phases, standard «peak fitting» procedure is not sufficient for getting quality data. Application of various statistical approaches allows to identify phase transitions and evaluate structural change.

Современное оборудование для микроанализа вещества *in situ* поставляет большие массивы данных, характеризующие анализируемый материал с высокой локальностью. Подобные массивы возникают при исследовании динамики изменения спектров при вариациях внешних условий—температуры в спектроскопии рамановского рассеяния (РР) света и др. Традиционные методы обработки данных—«peak fitting» с последующим сопоставлением параметров спектральных линий, не всегда продуктивны, особенно для плохоразрешенных спектров в низкосимметричных, разупорядоченных минералах. В работе выполнен анализ перспектив использования статистических методов для обработки данных рамановской термоспектроскопии; реализован ряд алгоритмов, условно классифицированных с целью их комбинирования при обработке данных на «интегральные», преобразующие сложный спектр или его температурную зависимость (ТЗ) в простую функцию—автокорреляционная (АКФ) и автоконволюционная функции,

преобразование Фурье; и «дифференциальные», дающие численную оценку различия или сходства двух спектров или их ТЗ–ковариация, критерий Пирсона [1]. Предложенные алгоритмы апробированы при анализе спектров РР при  $T=80-880$  К в кварце  $\text{SiO}_2$ , цирконе  $\text{ZrSiO}_4$  и титаните  $\text{CaTiSiO}_5$ ; последний характеризуется широким набором примесей, в том числе U, что вызывает химическое и авторадиационное разупорядочение структуры; типичен фазовый  $\alpha \rightarrow \beta$  переход при  $T \sim 500$  К [3]. Спектры РР минералов, в особенности, при повышенных  $T$  характеризуются сложной формой с перекрывающимися линиями (рис. 1а); при этом для циркона и кварца аномалий на ТЗ не фиксируется, в частности, полуширина центрального пика АКФ (параметра  $\Delta\text{corr}$  [5]) монотонно возрастает с ростом  $T$ , что отражает сдвиг и уширение колебательных мод без изменения типа структур. Напротив, для титанита на диаграмме  $\Delta\text{corr}$  vs  $T$  (рис. в) явно фиксируется область «аномального поведения» спектров. В работе проанализировано влияние химизма и степени кристалличности титанита на аномальную область; выполнено сопоставление с результатами, полученными в рамках других предложенных алгоритмов; показана перспективность их использования для количественного выделения «аномальных точек» на ТЗ спектров РР минералов с термоиндуцированными процессами, на пространственных профилях в неоднородных текстурированных зернах минералов.

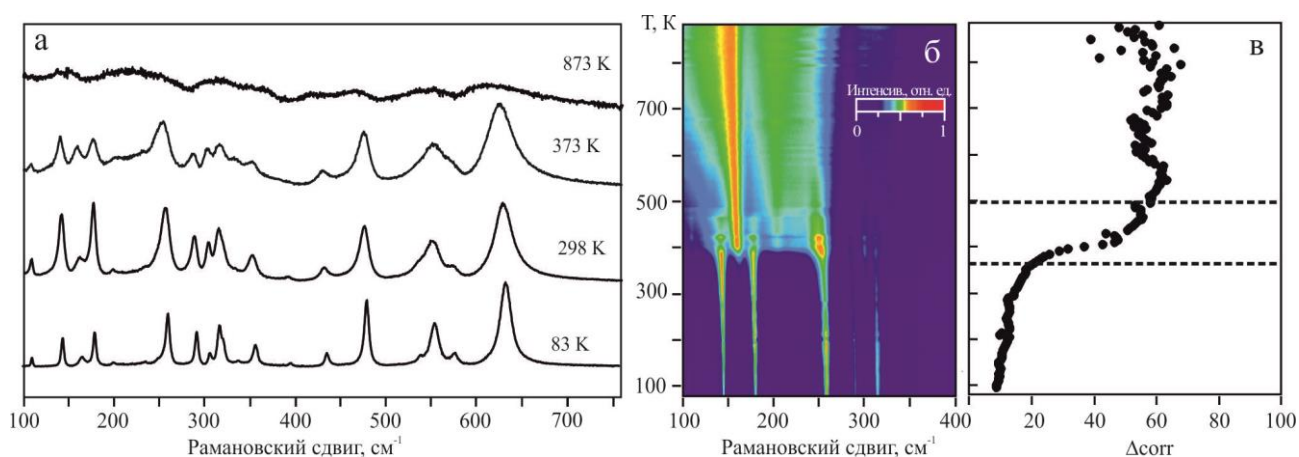


Рис. 1. Спектры РР титанита при 83-873 К (а), 2D-карта температурного изменения колебательных мод (б) и диаграмма  $\Delta\text{corr}$  vs  $T$  (в). пунктиры – зона фазового перехода (б); спектрометр LabRamHR800, лазер 633 нм, термоячейка Linkam TSM 600, пространственное разрешение  $\sim 2$  мкм.

*Работа выполнена в ЦКП УрО РАН «Геоаналитик» при финансовой поддержке гранта РФФИ № 16-17-10283 и гранта РФФИ № 17-05-00618\17.*

1. Press W.H, Teukolsky S.A., et al., Numerical Recipes in Fortran 77–Cambridge University Press (1992)
2. Axe J.D., Shirane G., Physical Review B., 1, 432-348 (1970)
3. Zhang M., Salje E.K.H., et al., Phys.: Condens. Matter., 25, 1-12 (2013).
4. Salje E.K.H., Carpenter M.A., et al., Eur. J. Mineral., 12., 503-519 (2000).